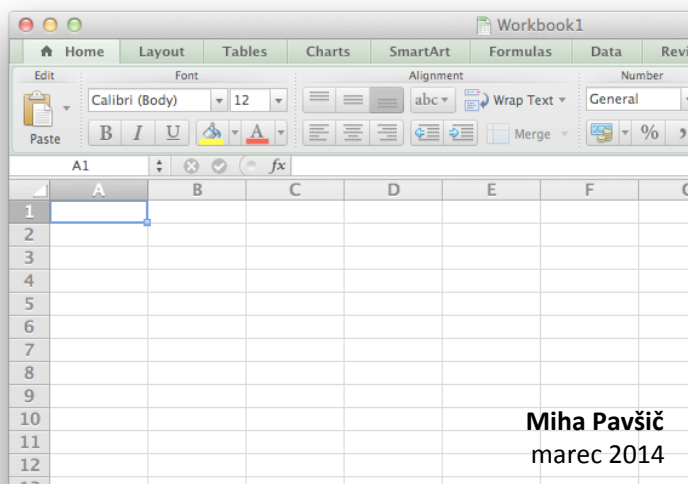


2. vaja

Tabele in diagrami



Miha Pavšič
marec 2014

Pregled vaje

Microsoft Excel - osnove

- naslavljanje celic
- tipi podatkov
- "samozapolnitev"
- osnove računanja
- osnove zapisovanja formul, primeri funkcij (*ostale so po enakem principu*)

Microsoft Excel – praktični primeri

- podatki v tabelah
- analiza podatkov v tabelah s pomočjo formul/funkcij
- risanje diagramov

Delali boste v Microsoft Excel v Windows; navodila veljajo seveda tudi za Microsoft Excel na OS X (nekoliko drugačen uporabniški vmesnik) ter OpenOffice/LibreOffice Calc (Windows, OS X, Linux), ...

Podrobnejša navodila – pogledjte v Pomoč / Help za posamezni program!

Praktični del (1/2) – tipi podatkov, osnove računanja, funkcije, ...

Datoteka: **02 – Funkcije.xlsx**

- Pregled nekaterih pogosto uporabljenih funkcij.
- Opis je podan s sivo, pod opisom je primer + zaslonska slika.
- V datoteko si lahko pišete svoje opombe (**morda jih obarvajte**).
- Priporočam, da si datoteko po končani vaji shranite (USB, e-pošta, ...).

Praktični del (2/2) – tipi podatkov, osnove računanja, funkcije, ...

Datoteka: **02 – Naloge.xlsx**

- Trije primeri uporabe tabel in funkcij:
 - obdelava podatkov kromatografskega eksperimenta (čiščenje proteina)
 - baza zaporedij peptidov
 - analiza hidrofobnosti proteina
- V datoteko si lahko pišete svoje opombe (**morda jih obarvajte**).
- Priporočam, da si datoteko po končani vaji shranite (USB, e-pošta, ...).
- V datoteki **02 – Naloge – RESENO.xlsx** so rešitve ☺
(Datoteka bo naložena v petek po vajah.)

Beer-Lambertov zakon

Biokemijsko ozadje

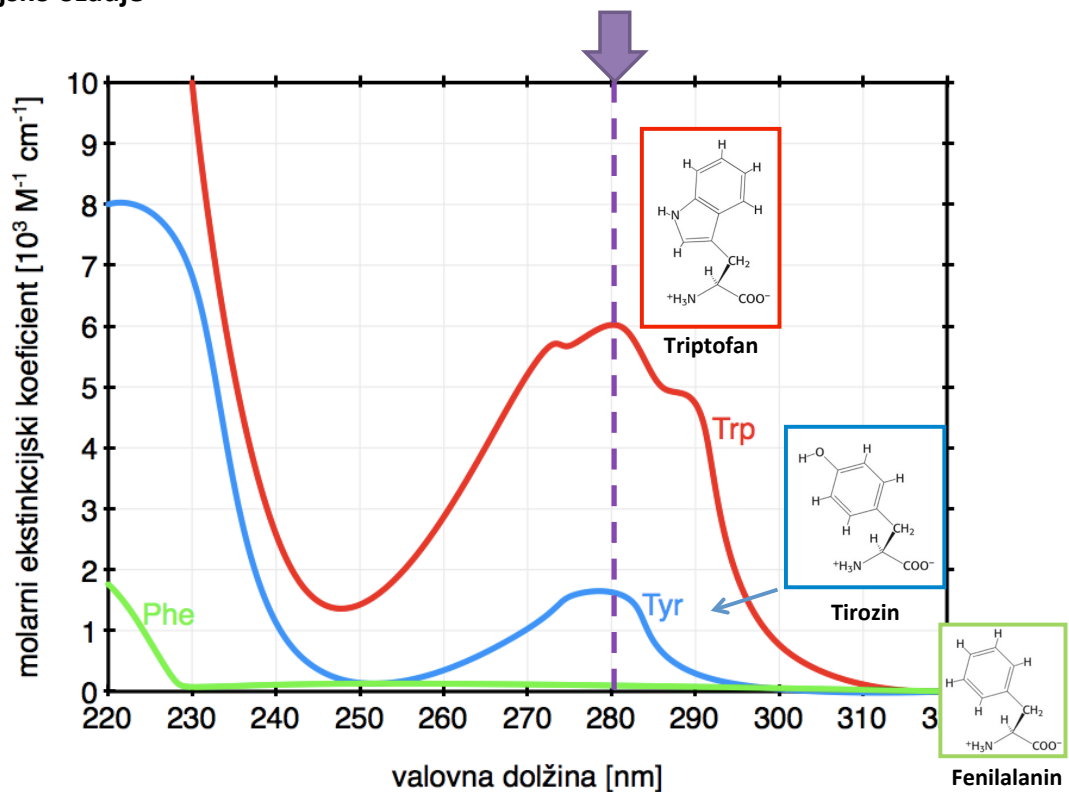
$$A_{280} = \epsilon_{280} \times c \times l$$

molarni ekstinkcijski koeficient $[M^{-1} \text{ cm}^{-1}]$
 množinska koncentracija $[M]$
 dolžina optične poti (debelina kivete) $[cm]$

$$A_{280}(\text{zmes}) = A_{280}(\text{protein 1}) + A_{280}(\text{protein 2}) + \dots$$

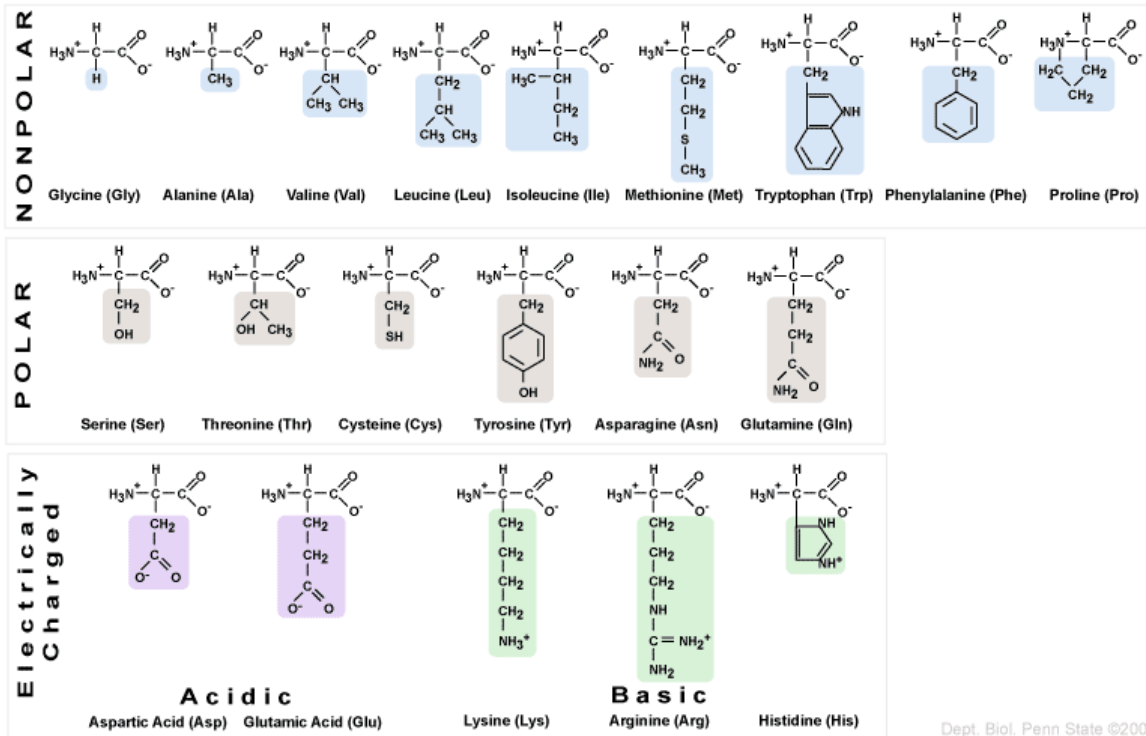
Absorpcija svetlobe z valovno dolžino 280 nm

Biokemijsko ozadje



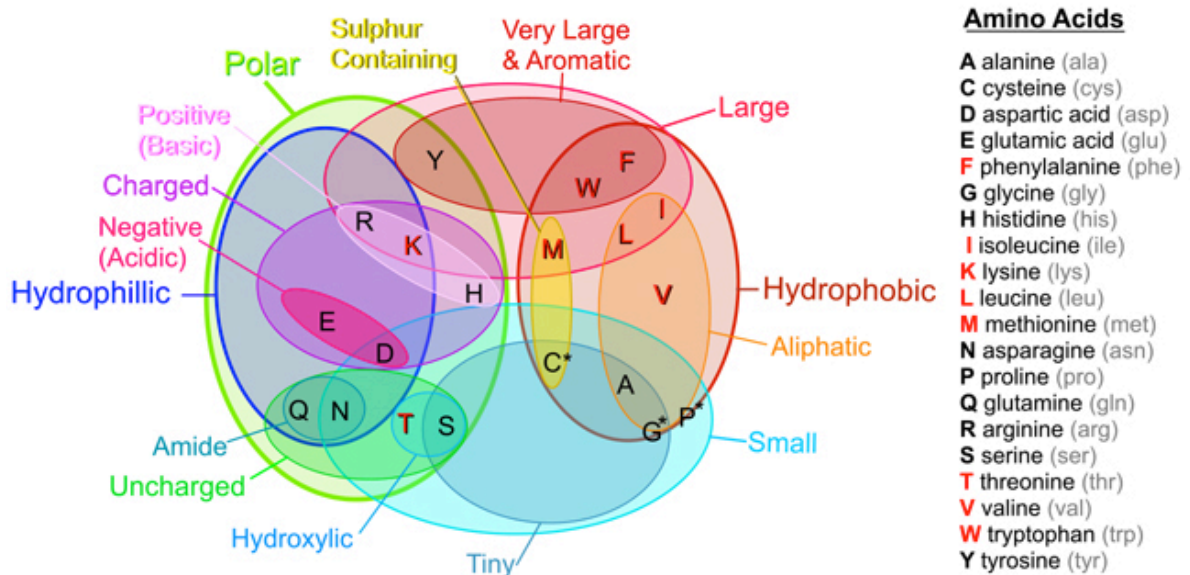
Lastnosti aminokislin

Biokemijsko ozadje



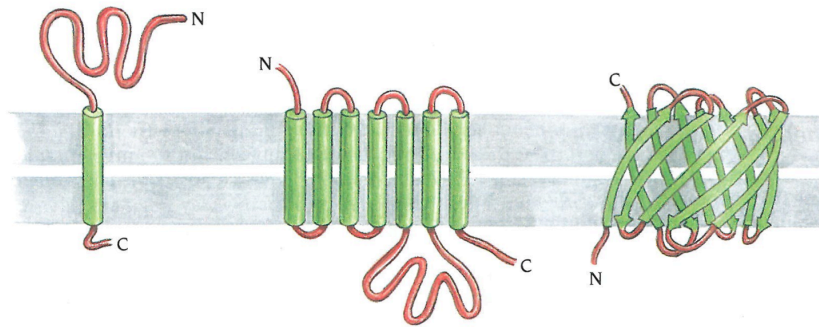
Lastnosti aminokislin

Biokemijsko ozadje



Transembranski proteini - arhitektura

Biokemijsko ozadje



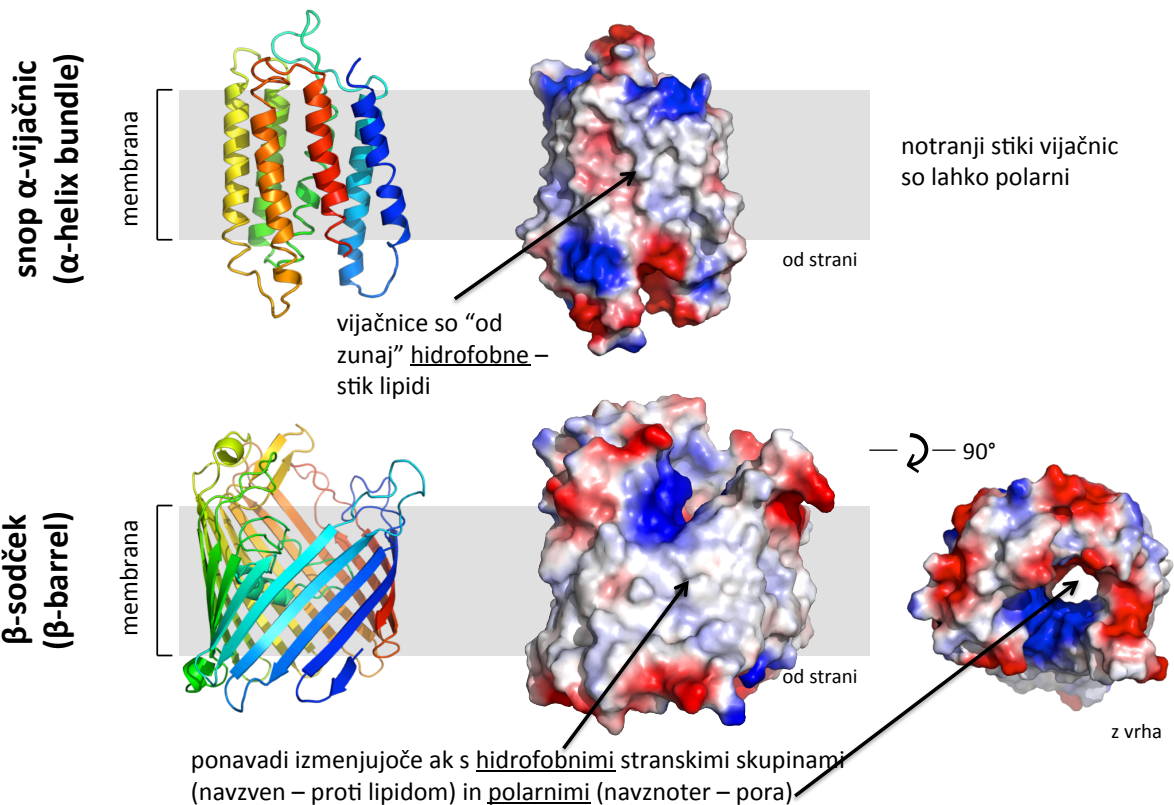
proteini s transmembranskim α -heliksom

β -sodček

Stranske skupine aminokislin, ki so v stiku s sredico lipidnega dvosloja, so večinoma hidrofobne.

Transembranski proteini in hidrofobne regije

Biokemijsko ozadje



Lestvice hidrofobnosti

Biokemijsko ozadje

- Hidrofobnost aminokislinskih ostankov oz. njihovih stranskih verig lahko opišemo z **lestvico hidrofobnosti**.
- Več lestvic:
 - na osnovi porazdelitve med polarnim in manj polarnim topilom (npr. voda/oktanol)
 - na osnovi površine, dostopne topilu, ter upoštevanju solvatacijske energije
 - na osnovi kromatografskih metod (vezava aminokislin oz. peptidov na hidrofobno stacionarno fazo)
 - druge fizikalno-kemijske lastnosti
 - na osnovi 3D struktur proteinov
- Primeri lestvic:
 - **Kyte&Doolittle**, Wolfenden: fizikalno-kemijske lastnosti aminokislin
 - Janin, Rose: analiza znanih 3D struktur

Lestvica hidrofobnosti Kyte-Doolittle

Biokemijsko ozadje

J. Mol. Biol. (1982) 157, 105–132
A Simple Method for Displaying the Hydrophobicity
JACK KYTE AND RUSSELL F. DOOLITTLE

Hydropathy scale and information used in the assignments

Side-chain	Hydropathy index	$\Delta G_{\text{transfer}}^{\circ}$ (water-vapor) ^a	Fraction of side-chains 100% buried ^b	Fraction of side-chains 95% buried ^c
Isoleucine	4.5	4.4	4.5	5.2
Valine	4.2	4.2	4.3	4.2
Leucine	3.8	4.5	3.2	2.8
Phenylalanine	2.8	2.5	2.5	3.5
Cysteine/cystine	2.5	1.9	6.0	3.2
Methionine	1.9	1.9	1.0	1.9
Alanine	1.8	3.9	5.3	1.6
Glycine	-0.4	—	4.2	1.3
Threonine	-0.7	-0.6	-0.5	-1.0
Tryptophan	-0.9	-0.9	-2.4	-0.3
Serine	-0.8	-0.8	-0.7	-1.0
Tyrosine	-1.3	-1.1	-3.3	-2.2
Proline	-1.6	—	-2.4	-1.8
Histidine	-3.2	-4.2	-3.6	-1.9
Glutamic acid	-3.5	-3.9	-2.8	-1.7
Glutamine	-3.5	-3.5	-4.0	-3.6
Aspartic acid	-3.5	-4.5	-2.5	-2.3
Asparagine	-3.5	-3.8	-3.1	-2.7
Lysine	-3.9	-3.2	—	-4.2
Arginine	-4.5	—	—	—

All values in the last 3 columns result from arbitrary normalization to spread them between -4.5 and +4.5. The normalization functions were:

^a $-0.679(\Delta G_{\text{transfer}}^{\circ}; \text{Table 1}) + 2.32$.

^b $48.1(\text{fraction } 100\% \text{ buried}; \text{Chothia, 1976}) - 4.50$.

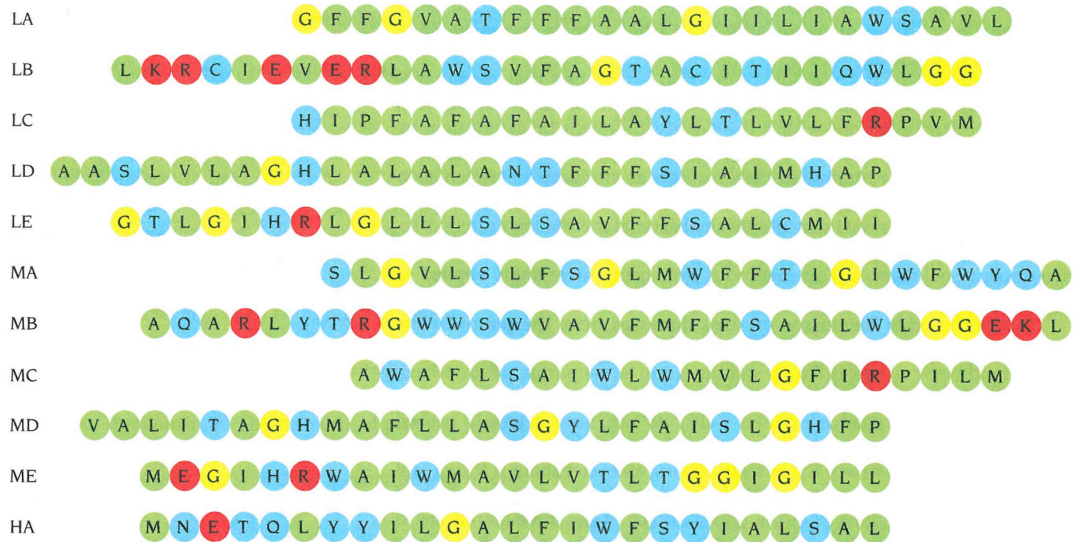
^c $16.45(\text{fraction } 95\% \text{ buried}; \text{Chothia, 1976}) - 4.71$.

Primeri transmembranskih vijačnic

Biokemijsko ozadje

Amino acid	Phe	Met	Ile	Leu	Val	Cys	Trp	Ala	Thr	Gly	Ser	Pro	Tyr	His	Gln	Asn	Glu	Lys	Asp	Arg
	2.8	1.9	4.5	3.8	4.2	2.5	-0.9	1.8	-0.7	-0.4	-0.8	-1.6	-1.3	-3.2	-3.5	-3.5	-3.5	-3.9	-3.5	-4.5

hidrofobnost po Kyte & Doolittle

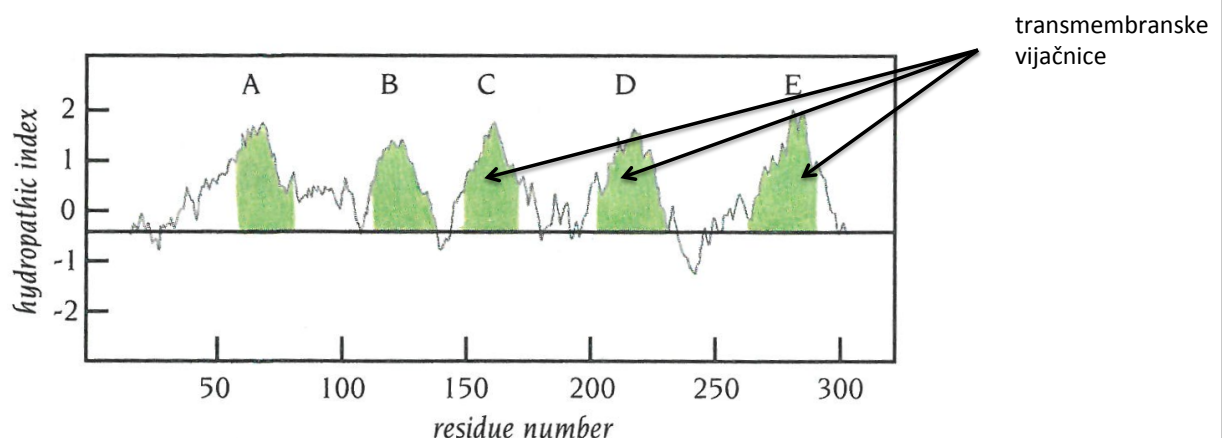


aminokislinska zaporedja transmembranskih vijačnic fotosintetskega reakcijskega centra iz *Rhodospirillum rubrum*

Napoved transmembranskih vijačnic

Biokemijsko ozadje

1. Ena transmembranska vijačnica - pribl. 20 ak ostankov.
2. Ak ostankom v zaporedju pripišemo hidrofobnost.
3. Narišemo diagram hidrofobnosti (na x-osi so zaporedne št. ak ostankov).
4. Približno 20 zaporednih ak ostankov s hidrofobno stransko skupino kaže na prisotnost transmembranske vijačnice.



Napoved transmembranskih vijačnic

Biokemijsko ozadje

“Šum” pri napovedi:

- zaradi vmesnih polarnih ak ostankov in
- prisotnosti morebitne (večje) topne (t.j., ne-transmembranske) domene s hidrofobno sredico v istem proteinu.

Šum zmanjšamo z uporabo okna:

- hidrofobnost izračunamo kot povprečje hidrofobnosti večih zaporednih ak ostankov (npr. 19 – približno toliko, kot je dolga ena transmembranska vijačnica),
- povprečje hidrofobnosti take regije (DRSEČE OKNO) pripišemo ak ostanku, ki je v sredini te regije.

Primer za drseče okno velikosti 5:

